

Studiedag "Dataflows in het Labo"

8 december 2009

Waarom Instrument Interfacing ?

KVCV
Sectie Analytische Chemie

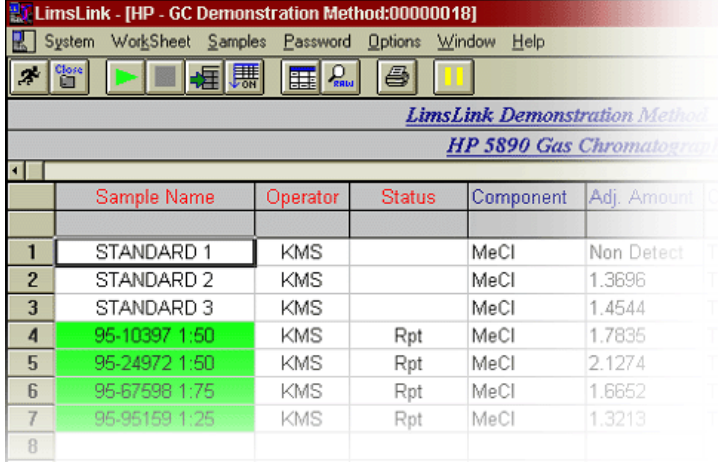
Dhr. Roel de Hoop
Consultant Laboratory Informatics

rdehoop@labfactor.nl



Agenda

1. Intro
2. Belang van Lab Data / Workflow
3. Waarom Instrument Interfacing ?
4. LimsLink
5. Cases



LimsLink - [HP - GC Demonstration Method:00000018]

System WorkSheet Samples Password Options Window Help

Close [Play] [Stop] [Print] [Refresh] [Help] [Exit]

LimsLink Demonstration Method
HP 5890 Gas Chromatograph

	Sample Name	Operator	Status	Component	Adj. Amount	Cl
1	STANDARD 1	KMS		MeCl	Non Detect	Te
2	STANDARD 2	KMS		MeCl	1.3696	Te
3	STANDARD 3	KMS		MeCl	1.4544	Te
4	95-10397 1.50	KMS	Rpt	MeCl	1.7835	Te
5	95-24972 1.50	KMS	Rpt	MeCl	2.1274	Te
6	95-67598 1.75	KMS	Rpt	MeCl	1.6652	Te
7	95-95159 1.25	KMS	Rpt	MeCl	1.3213	Te
8						

1.

Meedenken bij vraagstukken op het gebied van Laboratorium Data Management en laboratorium automatisering. (LIS, LIMS, SAP-QM, ELN, SDMS IDS, instrumenten etc)

2.

Software oplossing voor het verbeteren van de efficiency en het verminderen van risico's binnen laboratoria

3.

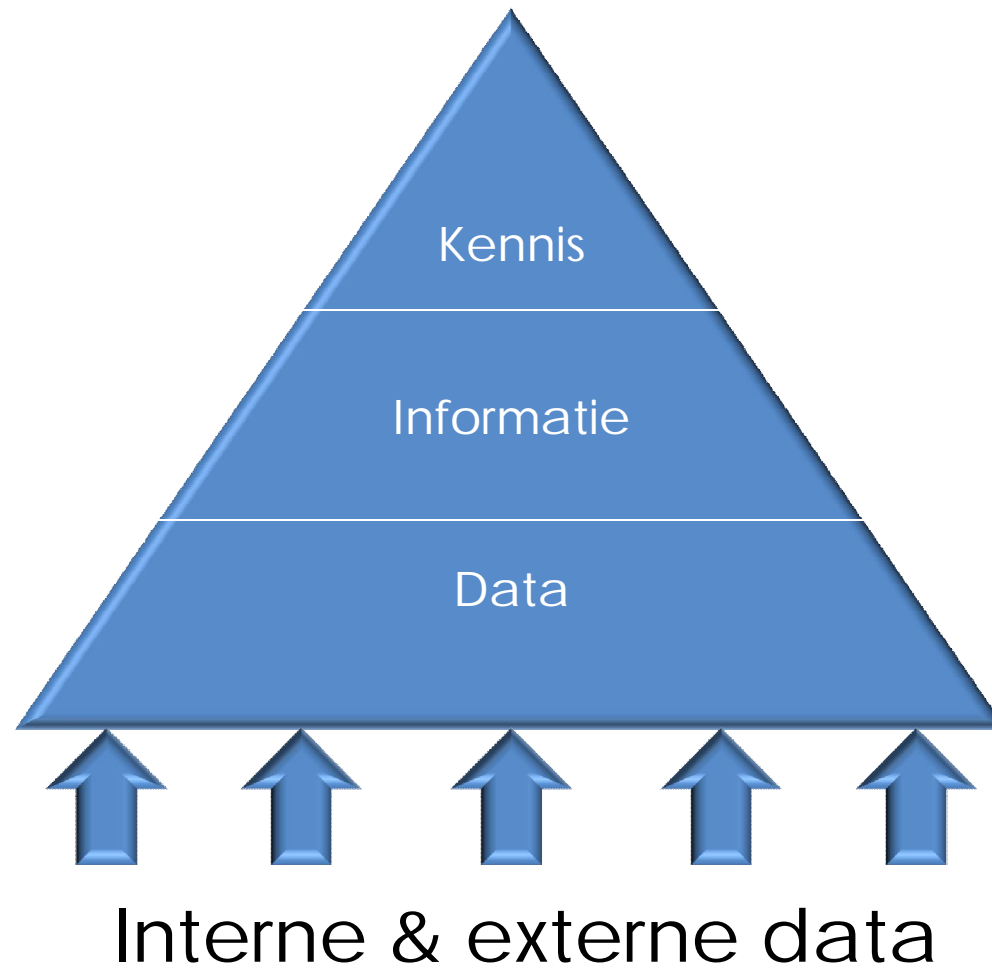
Focus op het bereikbaar maken van informatie, integratie van lab systemen en het automatiseren van procedures.

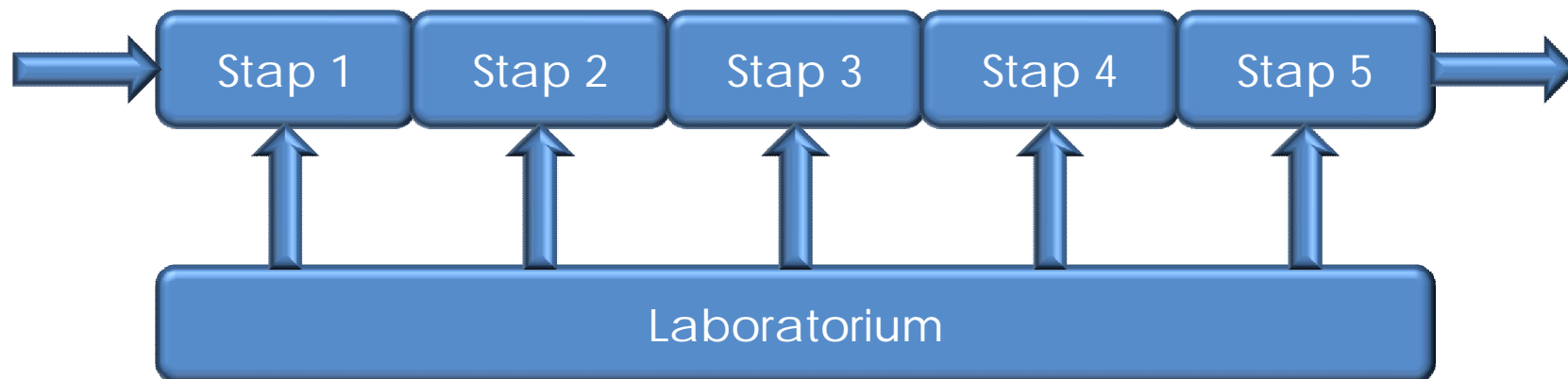
Papierloos Lab !!

Laboratorium Data

Help !







De informatie uit het Laboratorium vergroot de kennis over het proces,

beslissingen kunnen worden genomen,

acties kunnen worden geïnitieerd en uitgevoerd

Risico's

Vertraging binnen het (productie)proces

Hogere voorraad inkomende goederen

Hogere voorraad uitgaande goederen (CFA)

Verhoogd risico op product recalls

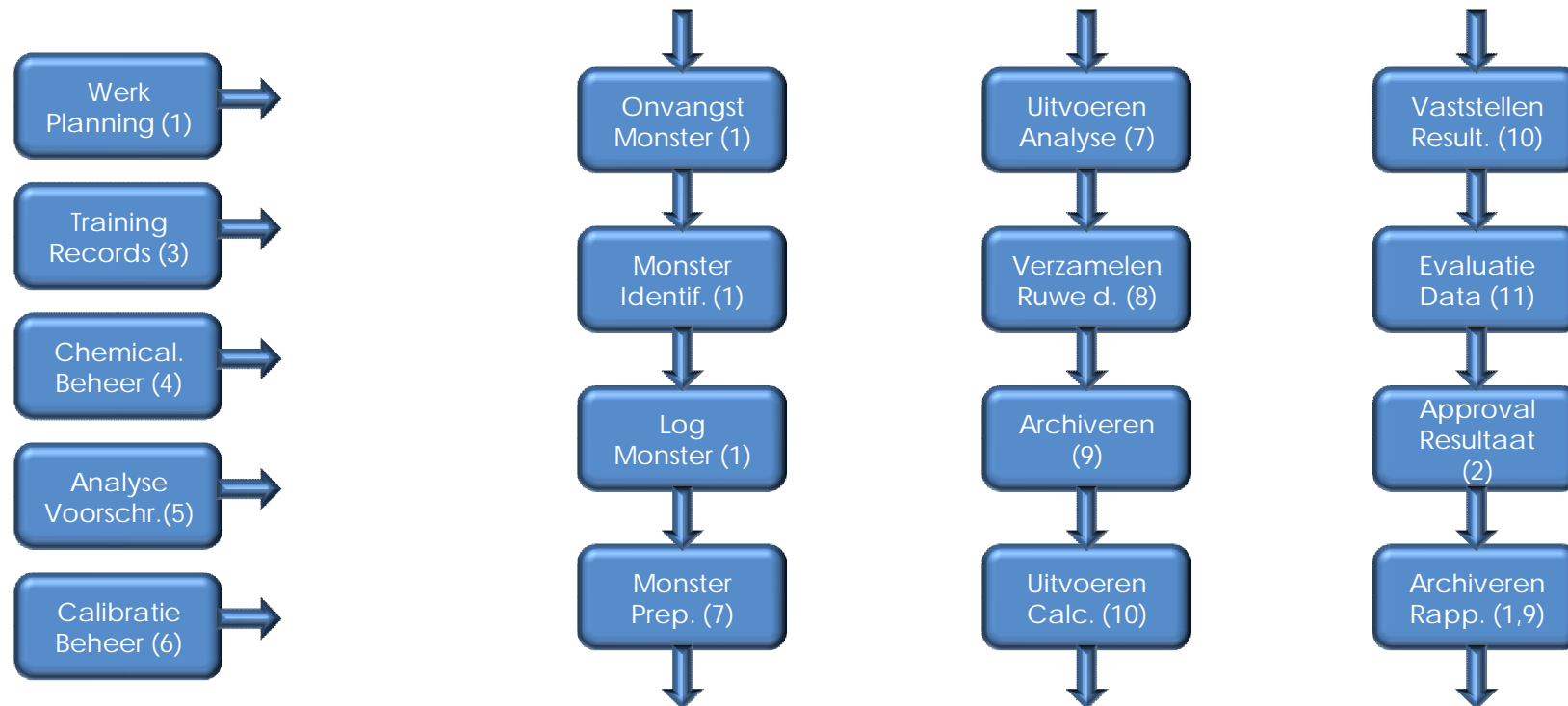
Compliancy gap (audit)

Euro's

Snel en correct de juiste data !!!!!



Workflow laboratorium



			applicatie		Applicatie
1	ERP,LIMS	5	WORD, Documentum, PDF	9	SDMS/ECM
2	Instr. Software, LIMS , Form	6	BlueMountain, Excel	10	Instrumenten Software, Excel
3	LIMS, WORD, speciale applicatie	7	eNotebook, Formulieren	11	Excel, Statistica
4	Chemsw, LIMS	8	CDS, Instrumenten software		

Waarom interfacing / integratie ?



1. Elimineer het handmatig verwerken van data

- beter gebruik van tijd (expertise)
- sneller verwerken van data
- kortere doorlooptijd
- efficiëntere manier van werken

2. Elimineer overschrijf/tikfouten

- voorkomen van ongewenste rapportage /beslissingen
- beter gebruik van tijd (error research)

3. Automatiseer methode

- voorkomen van rekenfouten
- voorkomen van ongewenste rapportage /beslissingen



Functies interfacing ?

Werklijsten

- Werklijsten ophalen/collecteren vanuit het LIMS
- Werklijsten uitbreiden met standaarden, blanco's etc.
- Werklijsten naar instrument/software sturen

Berekeningen

- Berekenen van resultaten
- Checken van limieten
- Checken t.o.v. standaarden & blanco's

Goedkeuren

- (semi)automatisch goedkeuren op basis van waarden
- (semi)automatisch goedkeuren op basis van status

Rapporteren

- (semi)automatisch rapporteren ERP/LIMS/SDMS/ECM /ELN etc.



LimsLink™

Standaard voor instrument - LIMS Interfacing



- Akzo-Nobel
- Eli-Lilly
- Astellas
- Baxter Healthcare
- Exxon-Mobil
- Unilever
- Bayer Corporation
- Imperial Tobacco
- Organon
- Boehringer Ingelheim Ltd.
- Johnson & Johnson
- Solvay Pharmaceutical
- Brown & Williamson
- Merck Pharmaceutical
- WLB
- Chevron
- Novartis
- Waterlab Zuid
- Dow Chemical
- Pfizer Inc.
- Vitens
- Dupont Pharmaceutical
- Pharmacia & Upjohn
- Waterproef

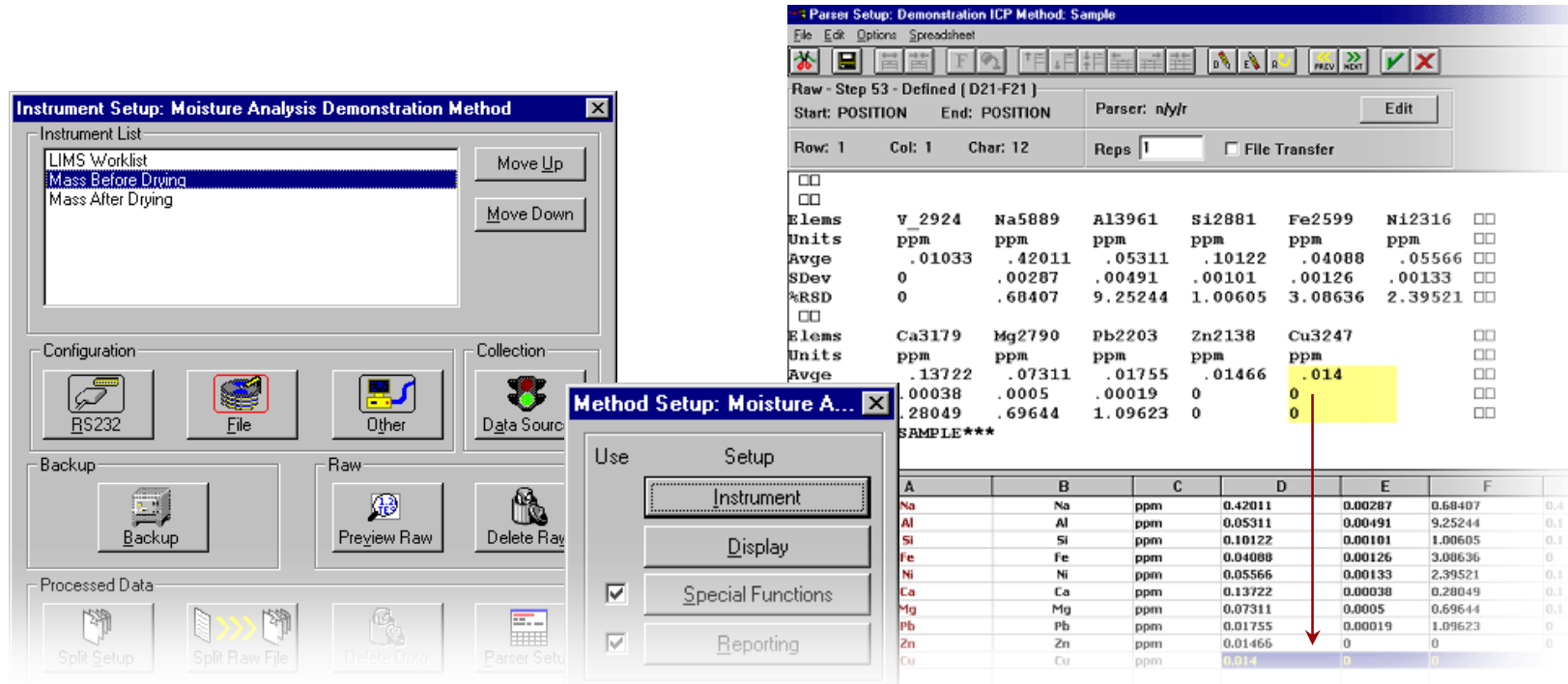
LimsLink

- Gemakkelijk te implementeren en onderhouden
- Mogelijkheid om data van verschillende bronnen te combineren
- Een standaard platform in het gehele lab
- Naast het collecteren van data ook zorgt voor het beheren van data-stromen binnen het lab
- Verzekeren van data zekerheid en integriteit

Eenvoudig te implementeren

In LimsLink worden methodes geconfigureerd d.m.v. 'visual tools' en 'drag and drop' technieken. In de methodes worden data collectie, het parsen van data en het bewerken van data gedefinieerd.

Er is geen programmeren vereist om een instrument interface op te zetten.



The screenshot displays the LimsLink software interface. On the left, the 'Instrument Setup: Moisture Analysis Demonstration Method' window shows a list of instruments: 'LIMS Worklist', 'Mass Before Drying', and 'Mass After Drying'. Below this are sections for 'Configuration', 'Collection', 'Backup', 'Raw', and 'Processed Data', each with various icons and buttons.

In the center, a 'Method Setup: Moisture A...' dialog box is open, showing a 'Use' section with 'Instrument' selected, and 'Special Functions' and 'Reporting' checked.

On the right, the 'Parser Setup: Demonstration ICP Method: Sample' window shows a spreadsheet view of data. The data is organized into two sections of elements and their units, average values, standard deviations, and relative standard deviations. A red arrow points from a value in the spreadsheet to a corresponding cell in a table below.

Row	Col	Char	Reps	File Transfer
1	1	12	1	<input type="checkbox"/>

Elms	v 2924	Na5889	Al3961	Si2881	Fe2599	Ni2316	
Units	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	
Avgc	.01033	.42011	.05311	.10122	.04088	.05566	
SDev	0	.00287	.00491	.00101	.00126	.00133	
%RSD	0	.68407	9.25244	1.00605	3.08636	2.39521	

Elms	Ca3179	Mg2790	Pb2203	Zn2138	Cu3247	
Units	ppm	ppm	ppm	ppm	ppm	
Avgc	.13722	.07311	.01755	.01466	.014	
	.00038	.0005	.00019	0	0	
	.28049	.69644	1.09623	0	0	

A	B	C	D	E	F	
Na	Na	ppm	0.42011	0.00287	0.68407	0.4
Al	Al	ppm	0.05311	0.00491	9.25244	0.1
Si	Si	ppm	0.10122	0.00101	1.00605	0.1
Fe	Fe	ppm	0.04088	0.00126	3.08636	0
Ni	Ni	ppm	0.05566	0.00133	2.39521	0.1
Ca	Ca	ppm	0.13722	0.00038	0.28049	0.1
Mg	Mg	ppm	0.07311	0.0005	0.69644	0.1
Pb	Pb	ppm	0.01755	0.00019	1.09623	0
Zn	Zn	ppm	0.01466	0	0	0
Cu	Cu	ppm	0.014	0	0	

Een grote variëteit aan instrumenten is met LimsLink aan LIMS gekoppeld. Een selectie van de met LimsLink gekoppelde instrumenten:

- GC/GC-MS
- HPLC/HPLC-MS
- LC/LC-MS
- ICP/ICP-MS
- Clinical Analyzers
- Spectrophotometers
- Density Meters
- Mercury Analyzers
- Plate Readers
- UV-VIS
- Balances
- pH Meters
- Titrators
- AAs
- TOC Analyzers
- AutoAnalyzers
- Particle Counters
- Physical Testing Equipment
- Colorimeters

Combineert data

Om deze grote verscheidenheid aan instrumenten te kunnen koppelen zijn er meerdere manieren beschikbaar om data in te lezen en te rapporteren.



RS232



File



Handmatig



TCP/IP



ODBC



API

Standaard Platform



- LimsLink zorgt voor een standaard uiterlijk en standaard gebruik van de in het lab benodigde interfaces.
- Een standaard interfacing platform reduceert de tijd die benodigd is om de analisten wegwijs te maken in het gebruik van de interfaces.

The screenshot displays three overlapping windows of the LimsLink software interface, each showing a different data table.

Window 1: LimsLink - [Leco CNS Demonstration Method:00000017]

Sample ID	Sample Weight	% Carbon
1 STANDARD 1	0.2000 g	-0.021
2 STANDARD 2	0.2000 g	-0.021
3 5882 02	0.1622 g	39.280
4 5882 03	0.1685 g	39.710
5 5884 03	0.1571 g	44.260
6 5884 04	0.1638 g	43.810
7 5885 02	0.1576 g	46.500
8 1055 01	0.1624 g	41.820
9 61196 01	0.1587 g	41.320
10 61196 02	0.1715 g	42.450
11 61198 01	0.1605 g	45.650
12 61198 02	0.1672 g	46.610
13 Peach	0.1719 g	45.480
14 61205 01	0.1740 g	42.670

Window 2: LimsLink - [TJA 61e ICP Demonstration Method:00000016]

Sample ID	Units	V	Na	Al	Si	Al+Si	Fe	Ni	Ca	Mo
1 STD1	ppm	ND	0.4	0.1	0.1	0.2	ND	0.1	0.1	0.1
2 STD2	ppm	198.8	98.4	49.7	50	99.7	49.8	50.4	49.9	49.7
3 A 1502	ppm	57	998.3	9.2	23.1	32.2	217	33.7	121.2	133.3
4 S 5874	ppm									
5 J 7413	ppm									
6 R 9511	ppm									
7 L 4432	ppm									
8 D 6175	ppm									
9 STD1	ppm									
10 STD2	ppm									

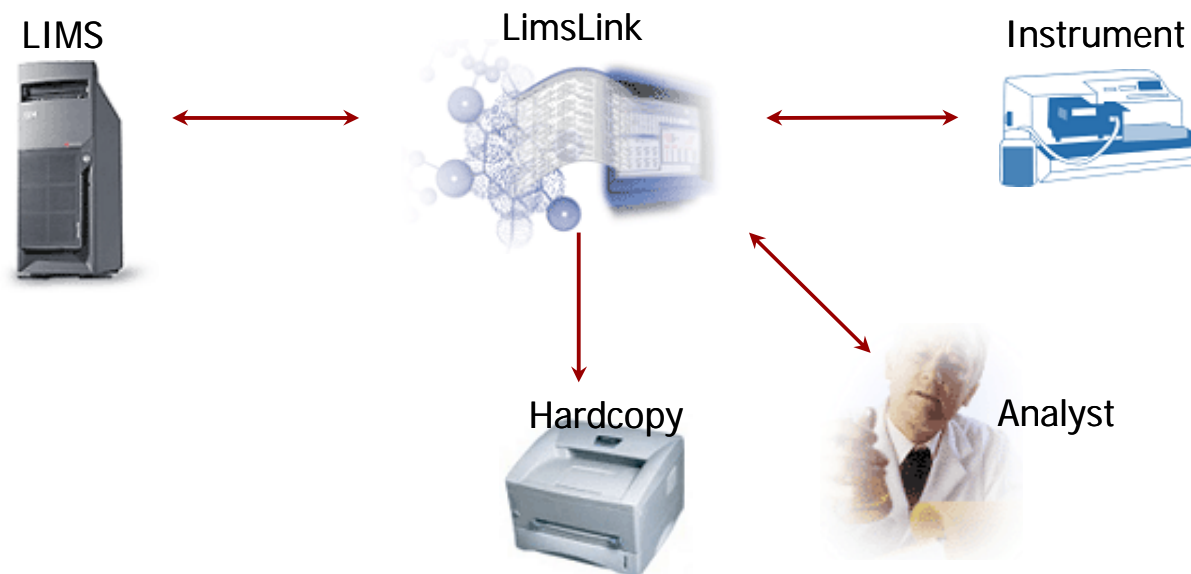
Window 3: LimsLink - [HP - GC Demonstration Method:00000018]

Sample Name	Operator	Status	Component	Adj. Amount	Component	Adj. Amount	Com
1 STANDARD 1	KMS		MeCl	Non Detect	TetCIE	Non Detect	1CL4
2 STANDARD 2	KMS		MeCl	1.3696	TetCIE	Non Detect	1CL4
3 STANDARD 3	KMS		MeCl	1.4544	TetCIE	6.0175	1CL4
4 95-10397 1:50	KMS	Rpt	MeCl	1.7835	TetCIE	Non Detect	1CL4
5 95-24972 1:50	KMS	Rpt	MeCl	2.1274	TetCIE	Non Detect	1CL4
6 95-67598 1:75	KMS	Rpt	MeCl	1.6652	TetCIE	1.0006	1CL4
7 95-95159 1:25	KMS	Rpt	MeCl	1.3213	TetCIE	Non Detect	1CL4
8							

Management van data

LimsLink beheert de stroom van data tussen het instrument, de analist en het LIMS.

Afhankelijk van de eisen van de applicatie biedt LimsLink verschillende niveaus van automatisering.



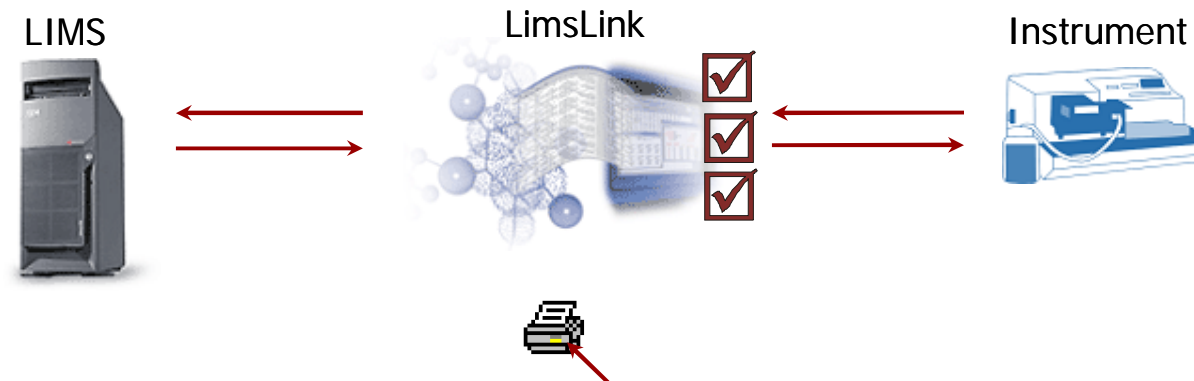
Blackbox

- Een interface die op de achtergrond draait
- Weining tot geen interactie met de gebruiker
- Meestal een bi-directionele interface



Review and Approval

- Beoordelen van de resultaten voordat deze naar het LIMS gerapporteerd worden
- Acties worden door het security system en audit trail geregistreerd



Management van data



Review and Approval

Worksheet: data van alle monsters, iedere regel vertegenwoordigt 1 monster

Single Sample Spreadsheet: details van de 'parsed' data per monster

Raw Data Display: ruwe data ingelezen van het instrument of instrumentsoftware

The screenshot displays three overlapping windows from the LimsLink software. The background window is a 'Worksheet' showing a table of samples. The foreground window is a 'Single Sample Spreadsheet' for sample 4, showing details like 'Sample Name: 95-10397 1:50' and 'Operator: KMS'. The rightmost window is a 'Raw Data Display' showing the instrument's output for the same sample, including 'Instrument #2', 'Sample Data', and 'Instrument #1'.

Sample Name	Operator	Status	Compor
1 STANDARD 1	KMS		MeCl
2 STANDARD 2	KMS		MeCl
3 STANDARD 3	KMS		MeCl
4 95-10397 1:50	KMS	Rpt	MeCl
5 95-24972 1:50	KMS	Rpt	MeCl
6 95-67598 1:75	KMS	Rpt	MeCl
7 95-95159 1:25	KMS	Rpt	MeCl
8			

A	B	C
1 Labtronics Inc.		
2 LimsLink Demonstration Method #0001		
3 HP 5890 Gas Chromatography		
4		
5		
6		
7 Sample Name 95-10397 1:50		
8 Operator KMS		
9		
10 Dilution Factor 1.0000		
11		
12 Component Adj. Amount		
13 MeCl 1.7835		
14 TetClE Non Detect		
15 1CL4FLBZ 44.0775		
16 1112TCA Non Detect		
17 ClBenz Non Detect		

```
Single Sample: 00000018 Sample #: 4
Previous Next Done
----- Instrument #2 -----
Sample Data -----
95-10397 1:50
----- Instrument #1 -----
Sample Data -----
"Software Version: ", "3.3 <4B11>"
"Sample Name: ", "95-10397 1:50" "Time: ", "7."
"Sample Number: ", "6" "Study: "
"Operator: ", "KMS"
"Instrument: ", "HP5890 #99_FREDDIE", "Channel: ", "A", "A/"
"AutoSampler: ", "NONE"
"Rack/Vial: ", "0,0"
```

LimsLink biedt een veilige omgeving om de integriteit van data te garanderen.

Password Protection

100 niveaus van password protection om de toegang tot menu's en setups te controleren.

Edit Protection

Wanneer data wordt gewijzigd, dient de gebruiker dit van commentaar te voorzien.

Electronic Signature

Bij bepaalde stappen in de interface dient de gebruiker zich te identificeren met naam en password.

Audit Trail

Logstelsysteem waarin systeemacties en toegang worden geregistreerd.

Praktijk Case #1; CDS systeem



Oude situatie:

- Chromatografie data (Waters) & SQL*LIMS
- Handmatig aanmaken van Sample Sets op basis van LIMS werklijst
- Beoordelen data in Empower en LIMS
- Kostbaar vanwege inzet personeel
- Lange 'turn around time'
- Kans op foutieve data

on wat6 as System/Administrator - Project

File Edit View Tools Database LimsLink Help

Filter By: Default Edit View Update Max Rows: 1000

	Sample Set Name	Sample Set Start Date	System Name
1	TM110408_072904_LC7	7/28/2004 4:15:05 PM EDT	LC_7
2	TM110408_072704_LC12	7/27/2004 6:00:45 PM EDT	HPLC 12
3	TM110408_072704_LC8	7/27/2004 3:46:39 PM EDT	LC_08
4	TM110408_072604_LC7	7/26/2004 4:45:17 PM EDT	LC_7
5	TM110408_072604_LC3	7/26/2004 4:11:50 PM EDT	LC_3
6	Shutdown_LC12	7/24/2004 6:28:57 PM EDT	HPLC 12
7	Shutdown_LC3	7/23/2004 4:53:08 PM EDT	LC_3
8	TM110408_072204_LC12	7/22/2004 5:28:28 PM EDT	HPLC 12
9	TM110408_072204_LC8	7/22/2004 4:33:30 PM EDT	LC_08
10	TM110408_072204_LC8	7/22/2004 4:28:33 PM EDT	LC_08
11	TM110408_072104_LC7	7/21/2004 5:11:48 PM EDT	LC_7
12	Shutdown_LC07	7/21/2004 4:14:49 PM EDT	LC_7
13	TM110408_072104_LC3	7/21/2004 2:53:35 PM EDT	LC_3
14	TM110408_072104_LC12	7/20/2004 3:18:20 PM EDT	HPLC 12
15	TM110408_072004_LC7	7/19/2004 5:04:57 PM EDT	LC_7
16	Shutdown_LC07	7/18/2004 4:52:54 AM EDT	LC_7
17	Shutdown	7/17/2004 11:38:14 AM EDT	LC_3
18	TM110408_071604_LC7	7/16/2004 1:44:24 PM EDT	LC_7
19	TM110408_071604_LC12	7/16/2004 12:49:01 PM EDT	HPLC 12
20	TM110408_071504_LC3	7/15/2004 2:52:09 PM EDT	LC_3
21	TM110408_071304_LC07	7/13/2004 4:08:00 PM EDT	LC_7
22	TM110408_071304_LC07	7/13/2004 4:06:08 PM EDT	LC_7
23	TM110408_071304_LC12	7/13/2004 3:21:39 PM EDT	HPLC 12
24	TM110408_071204_LC3	7/12/2004 5:14:54 PM EDT	LC_3

29 total

Praktijk Case #; CDS systeem

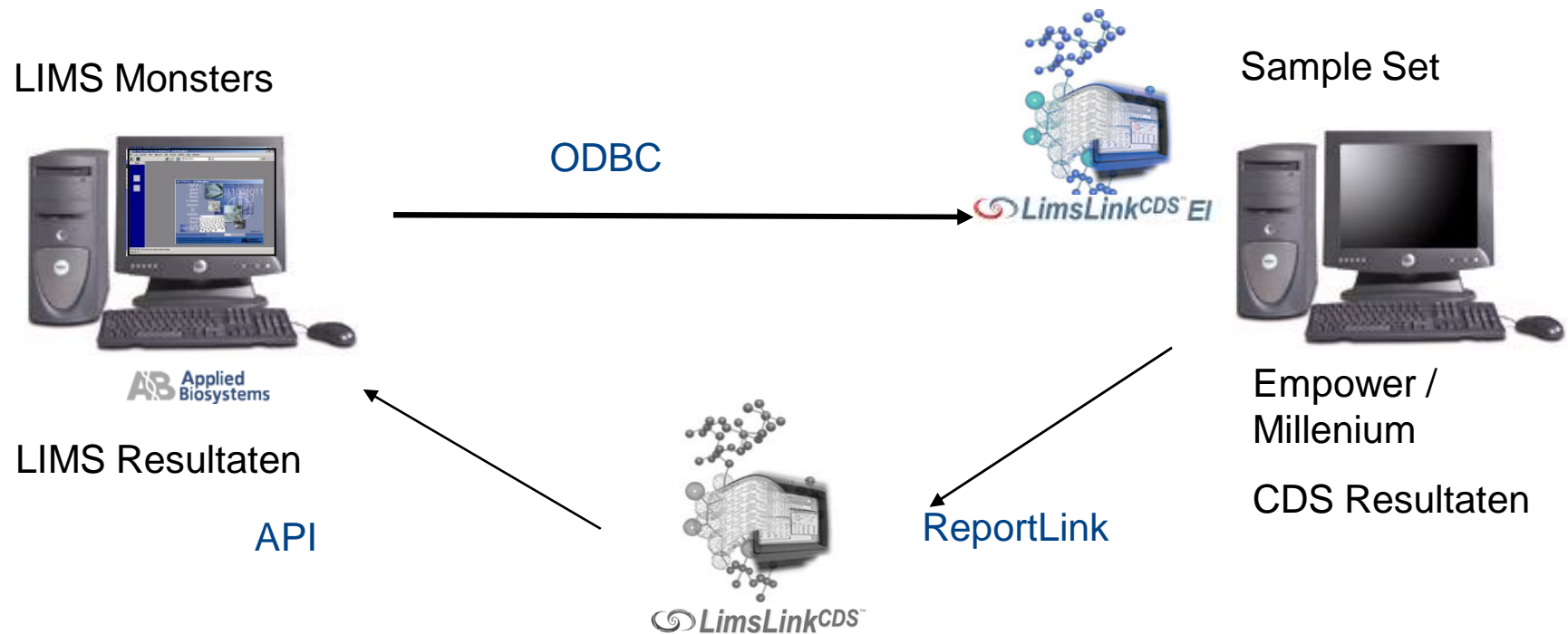


Gewenste situatie:

- Electronisch ophalen werklijst en aanmaken Sample Set
- Resultaten automatisch naar het LIMS
- Voldoen aan 21CFR Part11
- Citrix omgeving
- Opzetten en onderhouden in eigen beheer

Praktijk Case #1: CDS systeem

Oplossing:



Praktijk Case #1; CDS systeem



Resultaat:

- 52% minder tijd besteed aan data processing
- 500 monsters per dag
- Besparing van 15 man uren per dag
- Resultaat beschikbaar direct na approval (uur/dag/dagen)
- Geen foutieve resultaten
- Opzet en onderhoud LL-CDS in eigen beheer
- 300.000 resultaten per jaar / 9000 man uren / 5 fte's

Praktijk Case #2; ICP-MS

Oude situatie:

- Unilab Lims (werklijsten)
- Elan ICP-MS (ICP)
- Excel (Shewart kaarten)
- Unilab Lims (resultaten)

- Handmatig invoeren werklijsten in Elan software
- Berekenen resultaten & kwaliteits controle zeer tijdrovend
- Goedkeuren resultaten tijdrovend
- Kans op foutieve data



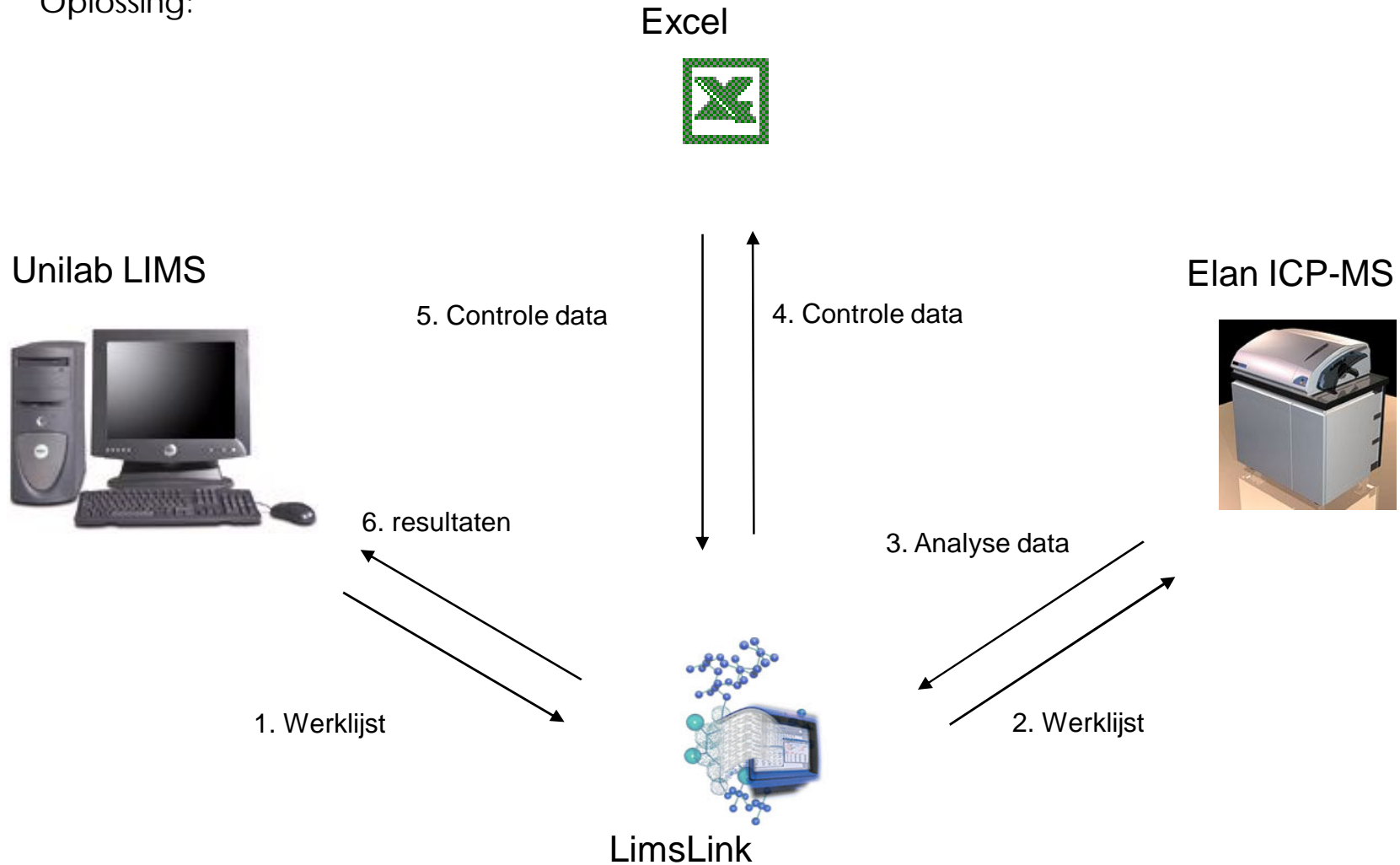
Gewenste situatie:

- Ophalen werkljst uit Unilab en aanmaken werkljst in ELAN software
- Automatiseren berekeningen en kwaliteitscontrole
- Automatiseren updaten shewhart kaarten (Excel)
- Opzetten en onderhouden in eigen beheer
- Oplossing die ook voor andere analyses en instrumenten ingezet kan worden.



Praktijk Case #2; ICP-MS

Oplossing:



Resultaat

- Besparing van 0,5 fte per jaar
- Minimaal aantal correcties
- Significante besparing op papier en archief
- Verhoogde traceerbaarheid data
- Ontwikkeling en onderhoud in eigen beheer
- Platform voor overige toepassingen (SP100,IC & TOC)
- Extra besparing van extra 0.5 fte per jaar.

Bronnen/Vragen ?



Bronnen:

ART-126 Why Instrument Interfacing ?

ART-115 Maximize Your LIMS Investment

ART-157 CDS_LIMS Interface Saves 9000 Man Hours Per Year

CS-110 Millennium32 – SQL LIMS Interface Reduces Data Handling by Over 50%

Vragen:

Dhr. Roel de Hoop

Consultant Laboratory Informatics

rdehoop@labfactor.nl

